数理解析研究所講究録
第 1844 巻 2013 年 10-22

グラフの幾何とスペクトルに関する諸問題
Some topics on geometry and spectra of graphs

YUSUKE HIGUCHI (SHOWA UNIVERSITY)*

ABSTRACT. Among many kinds of approaches to study the relationship between geometry and spectra of graphs, in this note we focus on a kind of quantum walk, which is introduced by M. Szegedy, whose time evolution is induced by the transition probability of a random walk on a graph. In particular, we study the periodicity of the evolution operator of such a quantum walk by using spectral analysis and properies of the cyclotomic polynomials. This is a joint work with Iwao Sato (Oyama National College of Technology).

0. 序.

本講演の依頼を受けたとき，講演者である本稿の筆者は，従来より集中的に研究してきた「無限グラフの幾何とスペクトル」についての話題提供を期待されていると思い，なおかつその話題で講演するつもりであった一方で，講演直前までに "面白い" 話題が見つかったら方針変更できるように，上記のような大雑把なタイトルをつけてしまった．実際には，ひょんなことから「有限グラフ上の量子ウォーク」のプロジェクトに参加することとなり，そこで当該研究集会に沿った (と個人的に考えている) 話題が提供可能となった．したがって講演および本稿は「有限グラフ上の量子ウォークの evolution operator の性質」にまつわる話題を提供することになり，それにより相応わしい題目としては**「量子ウォークが周期をもつ有限グラフのいくつかの例」(Some remarks on periodicity of discrete time quantum walks on finite graphs)** であることをお詫びをかねてまずここにお伝えするものである．

さて，量子ウォークは近年活発に研究されている対象であるが，残念ながら力不足な筆者にはここで説明できるものではないので，興味のある方は，たとえば参考文献に掲げた (十分ではないかも知れないが) [1,2,3,5,7,9,10,11,12,14] などの文献を参照されたい．しかし，感覚的に語ることが許されるのであれば，次のように述べてみたい：離散図形であるグラフという舞台の上で，粒子が頂点上を辺を介して渡り歩く様相を表現した従来の酔歩に対して，辺上の波が頂点を介して別の辺に伝搬する，

---

* 樋口 雄介 (昭和大学富士吉田教育部), e-mail: higuchi@cas.showa-u.ac.jp
This work was partially supported by the Grant-in-Aid for Scientific Research (C) 20540133 and (B) 24340031 from JSPS.

もしくは，散乱する様相を表現したものが量子ウォークではないか，と．まだまだ全貌が捕めていない感じではあるが，その一端は “Quantum graph walks” という今野紀雄氏 (横浜国立大学)， 佐藤巌氏 (小山高専)， 瀬川悦生氏 (東北大学) および筆者による 3 部作において垣間見られると思っている (part III は執筆準備中であるものの，part I と II はすでに arXiv にアップロード済み)．そこでは，量子グラフとして辺上をわたる波を考え，頂点におけるポテンシャル障壁に応じてどのように散乱するかを示したいわば “散乱振幅” をあらわした作用素 (scattering operator) と，量子ウォークの発展作用素 (evolution operator) を繋ごうとしたものとなっている．残念ながら本稿ではこれらの詳細に触れることはない．

では，本稿での主題は何か．注目したものは，Szegedy walk と言われるグラフ上の酔歩 (粒子の挙動) から誘導された量子ウォーク (波の挙動) であり，その両者のスペクトル構造の関係とそれを用いた幾何との相関である．より具体的には，有限グラフ上の酔歩の推移作用素と量子ウォークの evolution operator 間のスペクトル写像定理を両者の特性多項式の関係式として第 2 節にて表現し ([10] の別証明といえる)，さらにその応用として，周期をもつ量子ウォークのいくつかの例を第 3 節で列挙した．どれも解析的と代数的な面を持つ比較的簡単な話題ではあるが，筆者は今後に繋るなんらかの匂いを感じているので，ここに紹介するものである．尚，本研究は佐藤巌氏 (小山工高専) との共同研究である．

1．設定：グラフ上の酔歩と量子ウォーク．

グラフ $G=(V(G),E(G))$ は連結とし，$V(G)$ は頂点集合，$E(G)$ は無向辺集合を表わす．便宜上，$E(G)$ の各辺に対して 2 通りの有向辺を対応させて得られる有向辺集合を $A(G)$ で表し，また各有向辺 $e\in A(G)$ に対して，e の始点，終点をそれぞれ $o(e)$ と $t(e)$ で，さらに e の逆辺を $\bar{e}$ もしくは e^{-1} で表す．本稿ではグラフ G は有限グラフ，つまり，$V(G),E(G)$ ともに有限集合のものを扱い，**自己ループ** ($o(e)=t(e)$ なる辺) や**多重辺** ($o(e)=o(e')$ かつ $t(e)=t(e')$ である $e\neq e'$ なる辺 e と e') の存在も許すものとする．

ここでグラフ G の頂点 x に対して，$A_x(G)=\{e\in A(G);o(e)=x\}$ と置くと，$\#A_x(G)$ はいわゆる頂点 x の “次数” $\deg_G(x)$ となる．グラフ上の推移確率 $p\ :\ A(G)\to[0,1]$ を

$$\sum_{e\in A_x(G)}p(e)=1$$

をみたすように定める．推移確率 p が 可逆 (reversible) とは，正値関数 $m:V(G)\to$

$(0,\infty)$ が存在して

$$m(o(e))p(e) = m(t(e))p(\overline{e})(=: m_A(e))$$

を各辺 $e \in A(G)$ に対して満たしている．このような関数 m は p に対する 可逆測度 (reversible measure) と呼ばれるが，もし存在すれば定数倍を除いて一意的である．たとえば，単純酔歩といわれるものは $p(e) = 1/\deg_G(o(e))$ で定められるものであるが，このときは m を $m(x) = \deg_G(x)$ と定めれば，可逆になっていることが確かめられる：つまり単純酔歩は可逆である．

さて，推移確率 p が与えられたとき，G 上の推移作用素 $T = T_G$ とは，G が有限グラフのときは $|V(G)|$-次正方行列として表現され，$x, y \in V(G)$ に対して

$$(T_G)_{x,y} = \sum_{e:o(e)=x,t(e)=y} p(e)$$

となるものである．ここで右辺が $p(e)$ に関して和をとった形になっているのは，多重辺や自己ループの寄与を考えている．

T_G の 固有値全体からなる集合 (スペクトル集合) を $Spec(T_G)$ で表すと，$1 \in Spec(T_G)$ であり，また Perron-Frobenius の定理より任意の $\lambda \in Spec(T_G)$ に対して $|\lambda| \leq 1$ であることが分かる．さらに T_G が可逆であるときは $Spec(T_G) \subset [-1,1]$ であることもすぐ確認できる．

さて，グラフ上の量子ウォークに関しては，詳細は [1,2,3,6,8,9,10,11,12,14] 等に委ねることとして，ここでは Szegedy([14]) によって導入された酔歩に誘導される量子ウォークの evolution operator $U = U(T,G)$ を天下り的に与えることとする：

定義 1.1 (Szegedy walk の evolution operator U ([14])). Szegedy walk の evolution operator $U = U(G,T)$ とは，$f \in A(G)$ から $e \in A(G)$ への推移を表したもので，$|A(G)|$-次正方行列であたえられ，(e,f)-成分 が

$$(U)_{e,f} = \begin{cases} 2\sqrt{p(e)p(f^{-1})}, & o(e) = t(f) \text{ かつ } f \neq e^{-1} \text{ のとき}, \\ 2p(e) - 1, & f = e^{-1} \text{ のとき}, \\ 0, & \text{それ以外}, \end{cases}$$

で表されるものとする．

酔歩の推移作用素にあわせて，$(U)_{e,f}$ を "$t(e) = o(f)$ なる有向辺 e から f への推移" としたいところであるが，ここは量子ウォークの慣習に従うことにする．

ところで，この evolution operator U が "量子論" の要請をみたすべく，ユニタリ作用素 (今は直交行列) になっていることはすぐに確認できよう．なお，歴史的には T が単純酔歩のときを考えた Grover walk があり ([6])，それは (e,f)-成分が

$$(U)_{e,f} = \begin{cases} 2/\deg_G(o(e)), & o(e) = t(f) \text{ かつ } f \neq e^{-1} \text{ のとき}, \\ 2/\deg_G(o(e)) - 1, & f = e^{-1} \text{ のとき}, \\ 0, & \text{それ以外}, \end{cases}$$

で定められるものであるが，"Szegedy walk" はこれを一般化したものになっている．

今考えている量子ウォークの 離散時間発展作用素 $U = U(G,T)$ は，グラフ上の酔歩の推移作用素 $T = T_G$ から誘導されて与えられたものとなっている．したがって，U と T のスペクトルの "美しい" 関係を期待するが，実際次節で述べるような関係が知られているのである．

2. スペクトル写像定理.

以下，本稿で「**スペクトル写像定理**」といったら次の定理を表すこととする：

定理 2.1 (cf. E. Segawa [10], I. Sato et al.). *グラフ G を有限連結グラフとし，$n = |V(G)|$ および $2m = |A(G)| = 2|E(G)|$ とおく．さらに n-次正方行列 S を*

$$(S)_{u,v} = \sum_{o(e)=u,t(e)=v} \sqrt{p(e)p(e^{-1})}$$

とおくと，

$$\det(\lambda I_{2m} - U) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2+1)I_n - 2\lambda S)$$

が成立する．

ここで，T が可逆なときは，可逆測度 π on $V(G)$ を用いて n-次正方行列 D を $(D)_{x,y} = \sqrt{\pi(x)} \cdot \delta_{x,y}$ と定めると，$DTD^{-1} = S$ となる．したがって

$$\det(\lambda I_{2m} - U) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2+1)I_n - 2\lambda T)$$

と，直接 *Spec(T)* と *Spec(U)* との関係が得られる．ただし上記定理の特徴としては，むしろ "非可逆" な酔歩から誘導された evolution operator U に対しても，S を通しての 酔歩と量子ウォークのスペクトルの関係を与えたところともいえる．

定理 *2.1* の略証. $2m \times n$-行列 A および $2m \times 2m$-行列 P をそれぞれ以下のように定める：

$$A_{e,v} = \sqrt{p(e^{-1})}\delta_{t(e),v}, \quad P_{e,f} = \delta_{e^{-1},f}.$$

A, P を用いて，行列 S および evolution operator U はそれぞれ

$$S = ({}^tA)PA, \quad U = P(2A({}^tA) - I_{2m})$$

と表されること，さらに $P^2 = I_{2m}$ および $({}^tA)A = I_n$ に注意する．さて

$$\begin{aligned}\det(\lambda I_{2m} - U) &= \det(\lambda I_{2m} - P(2A({}^tA) - I_{2m})) \\ &= \det(\lambda I_{2m} + P - 2PA({}^tA)) \\ &= \det(\lambda I_{2m} + P)\det(I_{2m} - 2PA({}^tA)(\lambda I_{2m} + P)^{-1})\end{aligned}$$

と変形でき (ただし $\lambda \neq \pm 1$)，さらに $m \times n$-行列 A と $n \times m$-行列 B に対して

$$\begin{aligned}\det(I_m - AB) &= \det\left(\begin{pmatrix} I_m & -A \\ 0_{n,m} & I_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_m & A \\ B & I_n \end{pmatrix}\right) \\ &= \det\left(\begin{pmatrix} I_m & A \\ B & I_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_m & -A \\ 0_{n,m} & I_n \end{pmatrix}\right) = \det(I_n - BA)\end{aligned}$$

という基本的な性質と，$(\lambda I_{2m} + P)(\lambda I_{2m} - P) = (\lambda^2 - 1)I_{2m}$ を用いると，

$$\begin{aligned}\det(I_{2m} - 2PA({}^tA)(\lambda I_{2m} + P)^{-1}) &= \det(I_n - 2({}^tA)(\lambda I_{2m} + P)^{-1})PA) \\ &= \det(I_n - \frac{2}{\lambda^2 - 1}({}^tA)(\lambda I_{2m} - P)PA) \\ &= \det(I_n - \frac{2}{\lambda^2 - 1}(\lambda({}^tA)PA - ({}^tA)A)) \\ &= \det(I_n - \frac{2}{\lambda^2 - 1}(\lambda S - I_n))\end{aligned}$$

が得られる．したがって

$$\begin{aligned}\det(\lambda I_{2m} - U) &= \det(\lambda I_{2m} + P)\det(I_n - \frac{2}{\lambda^2 - 1}(\lambda S - I_n)) \\ &= (\lambda^2 - 1)^{m-n}\det((\lambda^2 + 1)I_n - 2\lambda S)\end{aligned}$$

となり，両辺とも $2m$ 次の多項式であるので，任意の λ に関して成立する．∎

定理 2.1 が意味していることは，G 上の酔歩の推移作用素 T が与えられたとき，とくに T が可逆なときには，

$$\det((\lambda^2 + 1)I_n - 2\lambda S)$$

の箇所より，$\lambda \in Spec(T)$ は U の固有値 $\lambda \pm \sqrt{-1}\sqrt{1 - \lambda^2}$ にいわば "遺伝" し，一方，U 独自の性質より，

$$(\lambda^2 - 1)^{m-n}$$

によって，いわばあらたに ±1 という固有値がそれぞれ多重度 $m-n$ を伴って "発生" する．なお，$m=n$ のときは "発生" 部分はなく " 遺伝" 部分のみとなる．さらに $m<n$ のとき，これは有限連結グラフでは $m=n-1$ という G が tree のときのみ生ずる場合であるが，このときは発生部分はないのはもちろん，T はつねに可逆となること，および，$\pm 1 \in Spec(T)$ となることより，遺伝部分からの固有値 ±1 の多重度が "発生" 部分の $(\lambda^2-1)^{-1}$ によって，それぞれ "1" となることに注意されたい．

なお，自明なことではあるが，可逆な T での $Spec(T)$ および $Spec(S)$ は $[-1,1]$ の部分閉区間であり，"遺伝" 部分に関しては，各 $\lambda \in Spec(S)$ に対して，実部が λ となる複素単位円上の 2 点 (虚部が正のものと負のもの) が U の固有値となっている．つまり，U の固有値の実軸への正射影が S の固有値となっているわけである．この「スペクトル写像定理」を用いて U の周期性を調べる，というのが次節の目標となる．

さて，量子ウォークの evolution operator の周期性とは：

定義 2.2 (Periodicity of U). 量子ウォークの evolution operator $U=U(G,T)$ が周期を持つ，とはある正の整数 k が存在して $U^k=I$ となることである．そのような整数が存在するときは，最小の正の整数をもって U の周期 (period) という．

同値なことではあるが，次のようにスペクトルの言葉で言いかえられる：量子ウォークの evolution operator $U=U(G,T)$ が周期を持つ，とはある正の整数 k が存在して，任意の $\lambda \in Spec(U)$ に対して $\lambda^k=1$ となることである．

次節に入る前に，簡単な例を見ておくことにしよう．G を長さ n のサイクルとして，その上の単純酔歩を考えると，すぐに分かるように

$$Spec(T)=\{\cos\frac{2k\pi}{n}\,;k=0,1,\ldots,n-1\}.$$

となる．この計算においては，"1 の n 乗根の実軸への射影，という様相になっていることからも,「スペクトル写像定理」により

$$Spec(U)=\{\exp\frac{2k\sqrt{-1}\pi}{n}\,;k=0,1,\ldots,n-1\}$$

および，それぞれの多重度は 2 となることもわかる．すなわち，$Spec(U)$ は "1" の n 乗根全体からなっているため，したがって $U^n=I_{2n}$ となり，周期 n をもつこととなる．もちろん，このような簡単な場合においては U を直接眺めてもすぐ分かることであるが，主張したいのは，長年の蓄積があるグラフ上の酔歩のスペクトルの情

報とスペクトル写像定理で，evolution operator の周期性に対して示唆を与えられる可能性がある，ということである．

3. evolution operator U の周期性 〜いくつかの例〜.

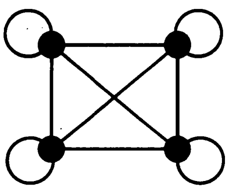
前節で宣言したように，この節ではいわゆる“良く知られたグラフ”に対して，U の“周期性”を調べてみることにする．グラフ上の推移作用素 T のスペクトルが簡単に計算できる場合においては，T から誘導される量子ウォークの evolution operator U のスペクトルが「スペクトル写像定理」により簡単に得られることを用いるものである．なお，“周期性を持つ量子ウォークの特殊性”が意味することの解明は今後の課題であり，今現在未知数の状態と聞いている．

ところで講演者がこの「周期性」に注目したきっかけについてだが，実はこれといった確固たる理由や哲学があってのことではないことをお詫びしておく．強いていえば，共同研究者の佐藤巌氏に「完全グラフの量子ウォークに周期性あるか」という問い掛けによって，この節での各種例の計算を行い，結果として“量子ウォーク”の世界に引き摺り込まれたといえば良いだろうか．

3.1. 完全グラフ K_n 上の単純酔歩に誘導される量子ウォーク.

ここでは G を完全グラフ K_n の各頂点にそれぞれ1つの自己ループを付与させたものとし，G 上での 次のような laziness ℓ を持つ“単純”酔歩を考える：

$$p(e)=\begin{cases}\frac{1-\ell}{n-1}, & \text{if } o(e)\neq t(e),\\ \frac{\ell}{2}, & \text{if } o(e)=t(e).\end{cases}$$



例： K_4 with 4 self-loops.

この $p(\cdot)$ によって定められる $V(G)$ 上の推移作用素 を T と置き，完全グラフ K_n 上の laziness ℓ を持つ 単純酔歩，と呼ぶ．

この酔歩の挙動は，同じ頂点に留まる確率 ℓ (これが laziness ℓ) であり，近傍には確率 $(1-\ell)/(n-1)$ で等しく推移するものとなっている．ここで，頂点 v に留まる確率は，$o(e)=t(e)=v$ なる有向辺 e とその逆辺である e^{-1} からの確率の寄与があることに注意されたい．なお $\ell=0$ のときは，完全グラフでの単純酔歩を表し，$\ell=2/(n+1)$ のときは，今の G での本来の単純酔歩となっている．

このようなグラフ上での酔歩に誘導される量子ウォークの evolution operator U の周期性に関しては，次のような結果が得られる：

命題 3.1 (QW on K_n の周期性). T を完全グラフ K_n 上の *laziness* ℓ を持つ単純酔歩の推移作用素とする．さらに，$\ell \in [0,1)$ かつ ℓ：有理数とすると，T に誘導される量子ウォークの *evolution operator* U が周期をもつのは

$$(n,\ell) = \begin{cases} (2,0) \Rightarrow U^2 = I, \\ (3,0) \Rightarrow U^3 = I, \\ (n,1/n) \Rightarrow U^4 = I, \\ (2,1/4),(n,(n+1)/(2n)) \Rightarrow U^6 = I, \end{cases}$$

のときのみであり，それ以外は周期を持たない．

命題 3.1 から，完全グラフでの通常の (つまり，laziness のない) 単純酔歩から誘導される量子ウォークにおいては，K_2 および C_3 と同型な K_3 といった自明な場合を除くと，周期性を持たないことが分かる．

証明の方針． 簡単に

$$Spec(T) = \{1,\ (\ell - \frac{1-\ell}{n-1})^{n-1}\}$$

が計算でき，よって「スペクトル写像定理」より $((n,\ell) \neq (2,0))$

$$Spec(U) = \{(\pm 1)^{m-n}\} \cup \{1^2,\ \lambda^{n-1}\},$$

が得られる．ここで λ は

$$x^2 - 2(\ell - \frac{1-\ell}{n-1})x + 1 = 0$$

の solutions である．$Spec(U)$ において，あきらかに ± 1 は 1 のべき乗根であるので，U が周期を持つには λ が 1 のべき乗根になることが必要かつ十分である．さて，λ が 1 の the primitive k-th root としよう．また，今は仮定より ℓ は 有理数としているので，“1 の the primitive k-th root” はある円分多項式からなる方程式の根になっていることになる．そこで円分多項式の有理係数既約性，などを使って (cf. [7,13,15]) n,ℓ を絞りこむと，主張のような n,ℓ の組合せが得られる．∎

上記の **命題 3.1** の証明では,「スペクトル写像定理」から得られる

$$x^2 - 2(\ell - \frac{1-\ell}{n-1})x + 1 = 0$$

を円分多項式 (cyclotomic polynomial) と対応付けて処理をしている．したがって ℓ が有理数であることが本質となっていて，一方 ℓ が “無理数” のときは証明の方針が思いつかない．なお，ℓ が有理数であることの優位性をあえて示すなら，各辺を m-

多重辺, 各点に k-多重 self-loop を付与した完全グラフを考え，そこでの単純酔歩で「有理数 ℓ の laziness を持つ単純酔歩の推移作用素」と同じ推移作用素となる m および k を適切に選ぶことができる．このときの evolution operator のスペクトルは上記の U のスペクトルと ± 1 の多重度が異なるだけであるので，周期性に関する結果も同じである．

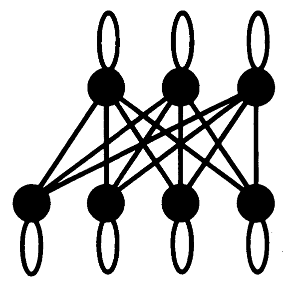
さて，この手法を用いて，酔歩の推移作用素 T のスペクトルが良く知られた，しかしもう少し複雑な構造を持つグラフに対して，以下，列挙していくこととする．

3.2. 完全 *2* 部グラフ $K_{n,m}$ 上の単純酔歩に誘導される量子ウォーク．

ここでは G を完全 2 部グラフ $K_{n,m}$ の各頂点にそれぞれ 1 つの自己ループを付与させたものとし，G 上での 次のような laziness ℓ を持つ "単純" 酔歩を考える：

$$p(e) = \begin{cases} \frac{1-\ell}{m}, & \text{if } o(e) \in A \text{ and } t(e) \in B, \\ \frac{1-\ell}{n}, & \text{if } o(e) \in B \text{ and } t(e) \in A, \\ \frac{\ell}{2}, & \text{if } o(e) = t(e). \end{cases}$$

ここで A, B は $K_{n,m}$ の部集合とし，$|A| = n$, $|B| = m$ と置いている．



例：$K_{3,4}$ with 7 self-loops.

なお，ここでも $\ell = 0$ のときは，完全 2 部グラフでの単純酔歩を表している．この $p(\cdot)$ によって定められる $V(G)$ 上の推移作用素 を T と置き，完全グラフ $K_{n,m}$ 上の laziness ℓ を持つ 単純酔歩，と呼ぶ．

命題 3.2 (QW on $K_{n,m}$ **の周期性**). T を完全グラフ $K_{n,m}$ 上の *laziness* ℓ を持つ単純酔歩の推移作用素とする．さらに，$\ell \in [0,1)$ かつ ℓ：有理数とすると，T に誘導される量子ウォークの *evolution operator* U が周期をもつための必要十分条件は $\ell = 0$ もしくは $\ell = 1/2$ となる．なお，$\ell = 0$ のとき $U^4 = I$ となり $\ell = 1/2$ のとき $U^6 = I$ となる．

ここでは完全グラフと異なり，周期性は頂点数には依存せず laziness のみで定まっている．

証明の方針． ここでも簡単に

$$Spec(T) = \{1,\ \ell^{n+m-2},\ \ell - 1\}$$

が計算でき，よって「スペクトル写像定理」により

$$Spec(U) = \{(\pm 1)^{mn-m-n}\} \cup \{1^2\} \cup \{\lambda_1^{n+m-2}\} \cup \{\lambda_2^2\},$$

が得られる．ここで λ_1, λ_2 はそれぞれ

$$x^2 - 2\ell x + 1 = 0, \quad x^2 - 2(\ell - 1)x + 1 = 0$$

の solutions である．完全グラフのときと同様に，$Spec(U)$ において，あきらかに ± 1 は 1 のべき乗根であるので，U が周期を持つには λ_1 と λ_2 がともに 1 のべき乗根になることが必要十分条件である．また，今は仮定より ℓ は有理数としているので，“1 の the primitive k-th root” はある円分多項式からなる方程式の根になっている．そこでやはり円分多項式の有理係数既約性，などを使って ℓ を絞りこむと主張のような結論が得られる．∎

3.3. 強正則グラフ $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ 上の単純酔歩に誘導される量子ウォーク．

いささか安易ではあるが，スペクトルが良く知られた例として，強正則グラフ (strongly regular graph) をここでは扱ってみることとする．

ここで，グラフ G が パラメータ (n, k, λ, μ) をもつ強正則グラフ $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ であるとは，$|V(G)| = n$ である k-正則グラフ (任意の頂点 x に対して $\deg_G(x) = k$ であるもの；ただし自己ループや多重辺をもたない連結グラフで，完全グラフではないものとする) で，頂点 x と y の共通近傍の数が x と y の選び方によらず，x と y が隣接していたら λ であり，x と y が非隣接ならば μ であるもの (cf. [4,5]) をいう．

ここでは $G = SRG(n, k, \lambda, \mu)$ 上の 単純酔歩を考え (すなわち，任意の e に対して $p(e) = 1/k$)，$V(G)$ 上のその推移作用素 を T と置く．

命題 3.3 (QW on $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ **の周期性**)．T を強正則グラフ $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ 上の単純酔歩の推移作用素とする．このとき T に誘導される量子ウォークの *evolution operator* U が周期をもつための必要十分条件は

$$(n, k, \lambda, \mu) = (2k, k, 0, k), (3\lambda, 2\lambda, \lambda, 2\lambda), (5, 2, 0, 1)$$

となり，周期はそれぞれ，4, 12 および 5 となる．なお，パラメータで実現するグラフはそれぞれ $K_{k,k}$, $K_{\lambda,\lambda,\lambda}$ および C_5 がある．

証明の方針．良く知られたように，強正則グラフ $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ が存在したら，そのスペクトルは

$$Spec(T) = \{1, \ (r/k)^{m_r}, \ (s/k)^{m_s}\}$$

となることが分かる (cf.[4,5]). ここで r, s は $x^2+(\mu-\lambda)x+\mu-k=0$ の solutions である．いままでと同様に「スペクトル写像定理」を用いて考慮すると，U が周期性を持つために必要十分条件は

$$G_r(x)=x^2-2(r/k)x+1, \quad G_s(x)=x^2-2(s/k)x+1$$

に対して $G_r(x)=0$ および $G_s(x)=0$ の全ての根が root of unity になることとなる．そこで， $r/k, s/k$ が**有理数** のときは parameters 間に成り立つ関係式，や，円分多項式の有理数体上既約性，などを用いて $G_r(x)$ および $G_s(x)$ がそれぞれ 2 次の円分多項式になる条件を絞る；一方，$r/k, s/k$ が**無理数** のときは，$G_r(x)$, $G_s(x)$ は有理数係数多項式でないため $r+s=\lambda-\mu$ および $rs=\mu-k$ を用いて，

$$\text{有理数係数 monic 多項式：} G(x)=G_r(x)G_s(x)$$

を考え，さらに parameters 間に成り立つ関係式，円分多項式の有理数体上既約性などを用いて 4 次の円分多項式になる条件を絞る．∎

3.4. サイクル C_n 上の非可逆酔歩に誘導される量子ウォーク.

さて，ここでは長さ n のサイクル C_n 上の非可逆 (non-reversible) な酔歩に誘導される量子ウォークの周期性について考察することにする．$G=C_n$ とし，$V(G)=\{x_i\ ;\ i=1,\ldots,n\}$ および $A(G)=A_0(G)\cup A_0^{-1}(G)$ かつ $A_0(G)=\{e_i\ ;\ o(e_i)=x_{i-1}, t(e_i)=x_i, i=1,\ldots,n\}$，$A_0^{-1}=\{e^{-1}\ ;\ e\in A_0(G)\}$ とする．ここで $i=1$ のときは $i-1=n$ を意味するものとしておく．さらに，ここで考える酔歩は $0\le p\le 1$ に対して

$$p(e)=p,\ \ e\in A_0 \text{ のとき；}\ \ p(e)=1-p,\ \ e\in A_0^{-1} \text{ のとき，}$$

と置く．平たくいえば，C_n の各点において，右回り方向の近傍への推移確率が p で，左回り方向の近傍への推移確率が $1-p$ となる，といったものである．$V(G)$ 上のその推移作用素を T と置く．ここで $p=1/2$ のときに T が 可逆 (reversible) になり，それ以外のときには T は 非可逆 (non-reversible) となる．さらに対称性から $1/2\le p\le 1$ を考えれば良いのだが，$p=1/2$ のときは C_n 上の単純酔歩となるのですぐに周期は n ということが分かり (cf. 第 2 節の最後)，また $p=1$ のときも周期が 4 (n によらない) であることもすぐ分かることから，以下 $1/2<p<1$ のときのみを考察する．

命題 3.4 (**非可逆酔歩による** QW on C_n **の周期性**). T を前述のような C_n 上の酔歩の推移作用素とする．$1/2 < p < 1$ とし，さらに $p(1-p)$ が有理数とする．このとき T に誘導される量子ウォークの *evolution operator* U は，**0)** $n \neq 2, 4, 8$ のとき U は周期をもたない；

1) $n = 2 : p(1-p) = 1/16$(周期 6), $1/8$(周期 8), $3/16$(周期 12) のときのみ；

2) $n = 4 : p(1-p) = 1/16$(周期 12), $1/8$(周期 8), $3/16$(周期 12) のときのみ；

3) $n = 8 : p(1-p) = 1/8$ のときのみ周期 24 を持つ．

証明の方針. $G = C_n$ 上の T に対して，"右回り" p，"左回り" $q(= 1-p)$ とする，T は reversible でないので S を用いた「スペクトル写像定理」により，

$$\det(\lambda I_{2m} - U) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)I_n - 2\lambda S),$$

ここで $S = 2\sqrt{pq}\,T_0$ かつ T_0 は simple RW on C_n としている．よって U が周期性を持つ必要十分条件は，$\lambda_k = 2\sqrt{pq}\cos\dfrac{2k\pi}{n}$ に対して，

$$x^2 - 2\lambda_k x + 1 = 0$$

の根がすべて root of unity になることである．

I) 任意の n で，$Spec(U)$ に

$$x^2 - 2\lambda_0 x + 1 = x^2 - 4\sqrt{pq}x + 1 = 0$$

の根は含まれるので，この根が root of unity になる条件を求める；

II) $n = 2^2, 2^3$ で，$Spec(U)$ の元がすべて root of unity になる条件を求める；

III) $n = 2^4$ のとき **I)II)** の条件の下で，

$$2\sqrt{pq}\cos\frac{2(2k-1)\pi}{16}, \quad k = 1, 2, 3, 4$$

が root of unity になりえないことを示す；

IV) n : 奇素数のとき **I)** の条件の下で root of unity にならない U の固有値の存在を示す．

V) n が奇素数 m もしくは $m = 2^4$ で割り切れるときは

$$\{U \text{ の } C_m \text{での固有値}\} \subset \{U \text{ の } C_n \text{での固有値}\}$$

に注意すると，**III)IV)** によって C_n 上の U は周期を持ちえないことが分かる．

各ステップにおいては，円分多項式にまつわる繁雑な計算をすることとなるが，これらのステップを経ることによって結論が得られる．∎

4. 最後に.

RIMS 共同研究『デザイン、符号、グラフおよびその周辺』での講演の機会，および当該報告の執筆の機会をいただいたことに感謝いたします．また，このような研究集会を企画・実施された研究代表者である澤正憲氏，副代表者である藤沢潤氏，平尾将剛氏 および 野崎寛氏 にはあらためて深く感謝いたします．

References

[1] A. Ambainis, *Quantum walks and their algorithmic applications*, International Journal of Quantum Information **1** (2003), 507–518.

[2] A. Ambainis, *Quantum walk algorithm for element distinctness*, SIAN Journal on Computing **37** (2007), 210–239.

[3] A. Ambainis, J. Kempe and A. Rivosh, *Coins make quantum walks faster*, Proc. 16th ACM-SIAM SODA (2005), 1099–1108.

[4] A. E. Brouwer and W. H. Haemers, *Spectra of Graphs*, Springer, 2011.

[5] P. J. Cameron and J. H. van Lint, *Designs, Graphs, Codes and their Links*, Cambridge University Press, 1991.

[6] L. Grover, *A first quantum mechanical algorithm for database search*, Proc. 28th ACM Symposium on Theory of Computing (1996), 212–219.

[7] S. Lang, *Algebra "Rev. 3rd ed."*, Springer, 2002.

[8] F. Magniez, A. Nayak, P. Richter and M. Santha, *On the hitting times of quantum versus random walks*, Algorithmica **63** (2012), 91–116.

[9] F. Magniez, A. Nayak, J. Roland and M. Santha, *Search via quantum walk*, Proc. 39th ACM Symposium on Theory of Computing (2007), 575–584.

[10] E. Segawa, *Localization of quantum walks induced by recurrence properties of random walks*, to appear in Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, [arXiv:1112.4982v2].

[11] S. Severini, *On the digraph of a unitary matrix*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications **25** (2003), 195-300.

[12] N. Shenvi, J. Kempe and K. B. Whaley, *Quantum random-walk search algorithm*, Phys. Rev. A **67** (2003), 052307.

[13] J. Stillwell, *Elements of Algebra*, Springer, 1994.

[14] M. Szegedy, *Quantum speed-up of Markov chain based algorithms*, Proc. 45th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (2004), 32–41.

[15] 高木貞治, 初等整数論講義 第 *2* 版, 共立出版, 1971.